

Transiciones de fase topológicas en cristales líquidos

Ricardo Paredes V.¹, Ana I. Fariñas-Sánchez¹ and Bertrand Berche²

¹*Centro de Física, Instituto Venezolano de Investigaciones Científicas,
Apartado 21827, Caracas 1020A, Venezuela, and*

²*Laboratoire de Physique des Matériaux, UMR CNRS 7556,
Université Henri Poincaré Nancy 1, B. P. 239, F-54506 Vandœuvre les Nancy cedex, France*

Mediante simulaciones de Monte Carlo, utilizando escalamiento de tamaño finito y transformaciones conforme se reportan evidencias de una transición de fase topológica en cristales líquidos en dos dimensiones. A altas temperaturas se presenta una fase paramagnética mientras que a bajas temperaturas se encuentra un fase de cuasi-largo-orden (QLRO). Se encuentra que a muy bajas temperaturas el exponente de la función de correlación de la fase QLRO es lineal con la temperatura teniéndose de esta manera un comportamiento típico de ondas de espín. Esto último contradice predicciones de que para sistemas con grupo de simetría global no abeliano las ondas de espín no son relevantes. Adicionalmente se discute que implicaciones tendría la presencia de impurezas en este tipo de transiciones.

PACS numbers: 68.35.Rh, 64.70.Md, 03.65.Vf

INTRODUCCIÓN

Mermin y Wagner[1] establecieron que para sistemas con grupo de simetría continuo no existe fase ferromagnética o de orden a largo alcance (LRO), a temperatura diferente de cero, para dimensiones menores o iguales que dos. Sin embargo, sistemas de este tipo pueden presentar un tipo de transición que está determinado por la aparición de defectos topológicos en pares a bajas temperaturas que justo en la transición, T_{KT} , se desligan[2, 3, 4]. A este fenómeno se le llama transición de fase topológica o transición de Berezinskii, Kosterlitz y Thouless (BKT).

El modelo XY, con grupo de simetría $O(2)$, presenta este tipo transición en dos dimensiones[4]. Entre sus características resaltantes tenemos que la fase LRO es sustituida, a bajas temperaturas, por un orden a cuasi-largo-alcance (QLRO). A muy bajas temperaturas, las correlaciones son dominadas por las ondas de espín obteniéndose una dependencia del exponente de la función de correlación, η , con la temperatura, T , de la forma: $\eta = T/2\pi$, donde la constante de Boltzmann $k_B = 1$ y el factor de acoplamiento $J = 1$. Debido a este comportamiento QLRO, a temperaturas menores que T_{KT} , la susceptibilidad, que mide las fluctuaciones de la magnetización, diverge. Otra característica de este tipo de transición es que a temperaturas justo por encima de la temperatura de transición $t = (T - T_{KT})/T_{KT} \gtrsim 0$, la longitud de correlación, ξ , diverge de una manera mucho más fuerte que la típica ley de potencias, $\xi \sim t^{-\nu}$, encontrada en las transiciones de segundo orden. Dicha divergencia es del tipo de una singularidad esencial: $\xi \sim \exp(bt^{-1/2})$.

Por otro lado, otro modelo de simetría continua como el de Heisenberg ferromagnético, con grupo de simetría $O(3)$, no presenta ningún tipo de transición de fase en $d = 2$ mientras que si presenta la típica transición para-ferromagnética en $d = 3$ [5, 6]. Por esta razón surgió la pregunta de que si sistemas con grupo de simetría no abelianos podían presentar transiciones del tipo BKT. Se ha reportado que el modelo de Heisenberg antiferromagnético completamente frustrado presenta una transición del tipo BKT pero sin correlaciones del tipo de ondas de espín a bajas temperaturas[7, 8].

Kunz y Zumbach[9] realizaron un estudio intensivo en $d = 2$, mediante simulaciones, del modelo RP^2 el cual consiste en un sistema con grupo de simetría global $O(3)$ pero con grupo de simetría local Z_2 . El modelo RP^2 describe la transición nemática isotrópica de cristales líquidos en $d = 3$. Ellos determinaron la longitud de correlación para $t \gtrsim 0$ y encontraron un buen ajuste para una singularidad esencial. Por otro lado, mediante escalamiento de tamaño finito, estimaron que también era válido un ajuste del tipo ley de potencia. Sin embargo, en base a cálculos de energía y calor específico así como de ciertas cantidades que estiman el número de defectos topológicos, argumentaron que la transición de fase debería ser del tipo BKT.

En el 2003 se retomó el estudio pero ahora utilizando el modelo de Lebwohl-Lasher(LL)[10] para describir a los cristales líquidos en $d = 2$. Este modelo ha sido muy exitoso para detectar la transición de fase discontinua débil que se observa en los experimentos de cristales líquidos en $d = 3$. En este modelo se representan las moléculas mediante vectores unitarios $\vec{\sigma}_w$ colocados en los sitios de una red hipercúbica Λ de longitud L . Para este sistema el Hamiltoniano viene dado por:

$$-\frac{H}{k_B T} = \frac{J}{k_B T} \sum_w \sum_{\mu} P_2(\vec{\sigma}_w \cdot \vec{\sigma}_{w+\mu}), \quad (1)$$

donde P_2 es el segundo polinomio de Legendre y la interacción es de primeros vecinos. En $d = 2$, se determinó[11] la presencia de un orden del tipo QLRO a bajas temperaturas con soluciones del tipo de ondas de espín cuando T tiende a cero. Esto se hizo mediante el novedoso método de las transformaciones conformes. De esta manera se concluyó, que sistemas con grupo de simetría no abeliano tenían transición BKT con correlaciones del tipo de ondas de espín a bajas temperaturas.

En el presente artículo revisará el método de transformaciones conformes y su utilidad para determinar exponentes de la función correlación para sistemas con invarianza de escalas. Luego estudiando el parámetro de orden nemático bajo T_{KT} , mediante escalamiento de tamaño finito, se obtendrá de nuevo el exponente de la correlación y se mostrará la excelente concordancia entre los dos procedimientos. Finalmente se discutirá el efecto de la presencia de impurezas sobre este tipo de transición.

MÉTODO DE LAS TRANSFORMACIONES CONFORMES

Uno de los grandes problemas que existe al simular un sistema físico es el de tener evidencia de lo que ocurre en el límite termodinámico. Por lo general, en los estudios de fenómenos críticos, se simulan sistemas a diferentes tamaños y se estudian como escalan las cantidades termodinámicas en función de L . El exponente de escalamiento de dichas cantidades tiene relación con los exponentes críticos asociados a dichas cantidades. El costo computacional es demasiado alto. Recientemente, para sistemas en $d = 2$ se ha comenzado a utilizar las transformaciones conformes (TC). Esta técnica consiste en realizar simulaciones en sistemas finitos y conectar los resultados con los de un sistema infinito vía una TC. Esto lo podemos realizar en sistemas que presenten invarianza de escalas y para $d = 2$.

Sistemas con invarianza de escala cumplen con la hipótesis de homogeneidad para la función de correlación de dos puntos para cualquier densidad ϕ , tal como el parámetro de orden, la energía, etc., $\langle \phi(b\vec{r}_2)\phi(b\vec{r}_1) \rangle = b^{-\eta} \langle \phi(\vec{r}_2)\phi(\vec{r}_1) \rangle$, donde b es un factor de escala y η es la dimensión anómala o exponente de la correlación. De la misma manera, si existe invarianza de escala, podemos relacionar mediante la hipótesis de homogeneidad la función de correlación entre sistemas que se conectan bajo una transformación conforme. Supongamos que las simulaciones se realizan en un sistema cuadrado ($w = u + iv$) de tamaño $L \times L$ ($-L/2 \leq u \leq L/2$, $0 \leq v \leq L$) y mediante una transformación de Schwarz-Christoffel lo mapeamos en el plano semi-infinito ($z = x + iy$, $0 \leq y < \infty$). Para esta transformación el cambio de escala es local y las funciones de correlación se relacionan mediante $\langle \phi(w_1)\phi(w_2) \rangle = |w'(z_1)|^{-x_\phi} |w'(z_2)|^{-x_\phi} \langle \phi(z_1)\phi(z_2) \rangle$, donde $x_\phi = \frac{1}{2}\eta$.

Si las simulaciones se realizan en una red cuadrada con condiciones de borde fijas se obtiene que el perfil de densidad (función de correlación de un punto) se comporta como una ley de potencia de la forma: $\langle \phi(w) \rangle_{\text{sq}} \sim \kappa(w)^{-\eta/2}$ con $\kappa(w) = \Im[z(w)](|1 - z(w)^2||1 - k^2 z(w)^2|)^{-1/2}$, donde $z(w) = \text{sn}(2Kw/L)$, siendo K la integral elíptica completa de primera clase, sn el seno elíptico de Jacobi y k una constante. Esta expresión se obtiene ya que el perfil para una red semi-infinita con condiciones de borde fijas se conoce exactamente $\langle \phi(z) \rangle_{\frac{1}{2}\infty} \sim y^{-x_\phi}$ [12].

Gracias a la invarianza de escalas presente en las fases del tipo QLRO, la metodología de las TC se aplicó con éxito en la determinación de los exponentes de la función de correlación del modelo XY en $d = 2$ a $t < 0$ [13, 14]. Más recientemente, utilizando las TC en el modelo LL para los cristales líquidos en $d = 2$, se concluyó la existencia de un orden QLRO en este sistema[11]. Para este problema la función de correlación de un punto utilizada es: $m(w) = \langle P_2(\vec{\sigma}_w \cdot \vec{h}_{\partial\Lambda(w)}) \rangle_{\text{sq}}$ donde $\vec{h}_{\partial\Lambda(w)}$ indica que todas las moléculas en el borde $\partial\Lambda(w)$ tienen la orientación fija \vec{h} . En la Fig. 1(a) se muestran los perfiles del parámetro de orden como función de κ . Se nota, como a temperaturas menores que T_{KT} , se presenta un comportamiento del tipo ley de potencias mientras que muy por encima de esta temperatura dicho comportamiento es abandonado indicando que el sistema se encuentra en una región donde no existe invarianza de escalas. La determinación del cambio de comportamiento se puede hacer de manera cuantitativa calculando el χ^2 [11]. En la Fig. 1(b) se grafican los exponentes de la correlación obtenidos a partir de los ajustes de la Fig. 1(a) como función de T . A muy bajas temperaturas se observa el comportamiento lineal típico de las ondas de espín.

ESCALAMIENTO DE TAMAÑO FINITO

En el presente trabajo se realizaron simulaciones del modelo LL en dos dimensiones con condiciones de borde periódicas. Las simulaciones se hicieron para temperaturas comprendidas entre $T = 0.4$ y $T = 0.58$. Se simularon sistemas con longitudes comprendidas entre $L = 16$ y $L = 512$. Se empleó el algoritmo de Wolff[15]. Se tomaron del orden de 10^5 pasos de equilibración y 10^6 pasos de promediación. Los tiempos de relajación para todos los tamaños y longitudes no sobrepasaron los 200 pasos de Monte Carlo. En particular, se reportan estimados del exponente de la

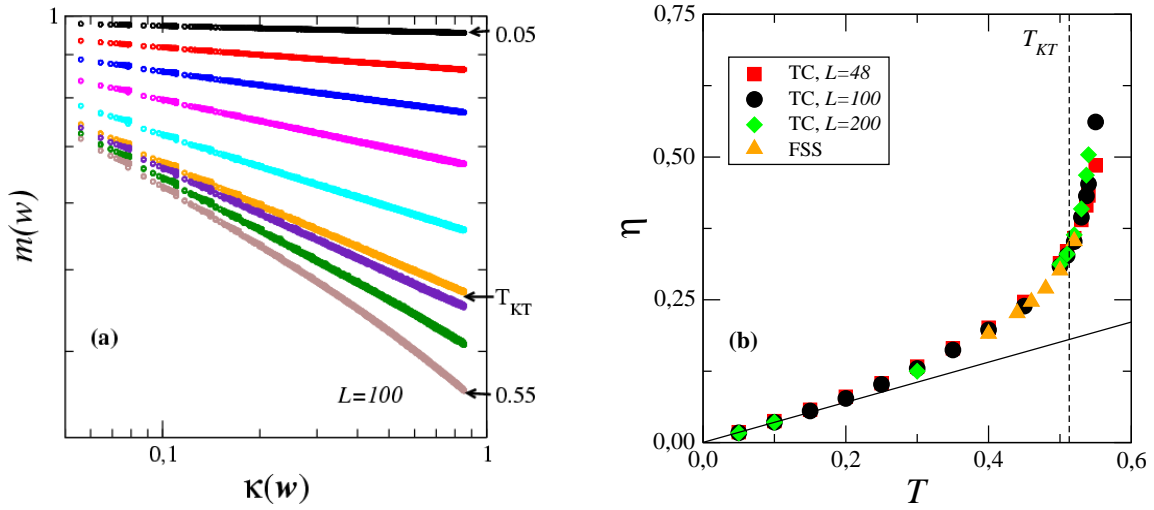


Figure 1: a) Parámetro de orden $m(w)$ local en función de $\kappa(w)$ para diferentes temperaturas. Se nota un comportamiento del tipo ley de potencias para valores de temperatura menores que el valor $T_{KT} = 0.513$ obtenido por Kunz y Zumbach[9]. b) Exponente de la función de correlación como función de la temperatura utilizando los ajustes de la Fig. 1(b) junto con los obtenidos para $L = 48$ y $L = 200$. Los triángulos representan los estimados hechos a partir de escalamiento de tamaño finito. A temperaturas cercanas a cero se observa el comportamiento $\eta \propto T$.

función de correlación del parámetro de orden utilizando la técnica de escalamiento de tamaño finito para el parámetro de orden.

Un buen parámetro de orden para describir la transición de fase nemática-isotrópica, en $d = 3$, para el modelo LL es:

$$M = L^{-2} \left\langle \sum_w P_2(\vec{\sigma}_w \cdot \hat{n}) \right\rangle = L^{-2} \left\langle \sum_w P_2(\cos \theta_w) \right\rangle, \quad (2)$$

donde \hat{n} es un vector unitario que indica la dirección preferencial y se le denomina director y θ_w es el ángulo entre $\vec{\sigma}_w$ y el director. M tiende a 1 a muy bajas temperaturas y a 0 a altas temperaturas. En $d = 2$, M debería ser 0 para todo T ya que no puede haber rompimiento de la simetría continua[1].

En la Fig 2.(a) se tiene una gráfica del parámetro como función de la temperatura. Se observa un valor finito del parámetro de orden a temperaturas bajas. Sin embargo, la tendencia es que disminuya al aumentar L . En la Fig. 2(b) se muestra el comportamiento del parámetro de orden con la longitud del sistema. Obsérvese que para temperaturas bajas el comportamiento es del tipo ley de potencia. Esto indica la presencia de invarianza de escalas para $T < T_{KT}$ o lo que es lo mismo un orden del tipo QLRO. Sobre T_{KT} la caída es exponencial, comportamiento característico de una fase paramagnética. El exponente de la ley de potencia obtenido a bajas temperaturas es el correspondiente a la función de correlación de un punto, es decir, $\frac{1}{2}\eta$. Colocando los exponentes provenientes de los ajustes realizados con los datos de la Fig. 2(b) en la Fig. 1(b) tenemos que la correspondencia entre las dos metodologías reportadas es excelente.

DISCUSIÓN

En el presente trabajo se reportan evidencias de que a bajas temperaturas existe un orden del tipo QLRO. La manera más eficiente de realizar estos estimados es mediante el uso de la técnica de las transformaciones conformes ya que solo se necesita hacer simulaciones en un solo tamaño de red, inclusive para los primeros resultados bastó el uso de una red pequeña ($L = 48$). El costo computacional del método de escalamiento de tamaño finito es mucho mayor al tener que simular para muchas longitudes de red y tamaños mayores. Realizando estudios del escalamiento de la susceptibilidad se tiene un porcedimiento alternativo para el cálculo del exponente η al igual de una forma muy precisa para determinar que en T_{KT} la singularidad es esencial[16]. Por lo tanto, definitivamente se concluye que, para los cristales líquidos en $d = 2$, se tiene un sistema con grupo de simetría global no-abeliano que presenta una transición BKT con orden QLRO a bajas temperaturas.

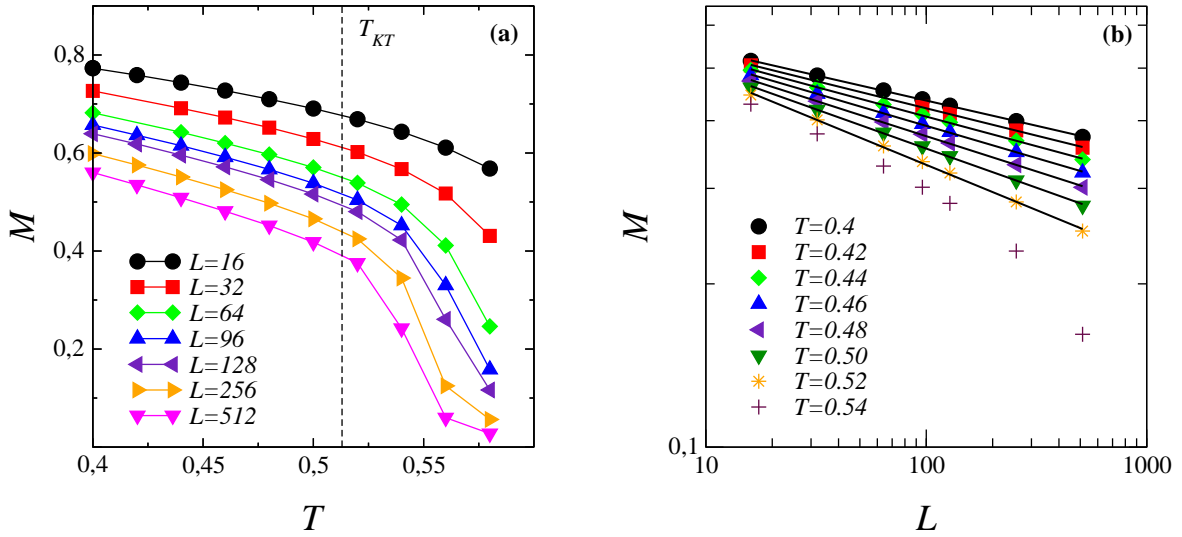


Figure 2: a) Parámetro de orden en función de la temperatura para diferentes tamaño L del sistema. Se observa como al incrementar L el valor de M para cada T disminuye. El valor de T_{KT} mostrado es el estimado por Kunz y Zumbach [9]. b) Para cada T el parámetro de orden en función de L . Comportamiento del tipo ley de potencia para $T < T_{KT}$. Por encima de la temperatura crítica la tendencia es la de un comportamiento exponencial.

En la literatura se ha reportado que para sistemas con transición de tipo BKT, la introducción de desorden en los enlaces es totalmente irrelevante[17]. Esto se debe a que debido a la singularidad esencial para $t > 0$ el exponente del calor específico $\alpha \rightarrow -\infty$ ($2 - d\nu = \alpha$) y debido al criterio de Harris[18] los exponentes críticos del sistema puro no deberían cambiar. Sin embargo, debido a cambios que aparecen en la coordinación el valor de T_{KT} debería depender de la intensidad, c , del desorden. Si se realizaran simulaciones del LL con enlaces aleatorios obtendríamos que el exponente de la correlación sería idéntico para todos los valores $T_{KT}(c)$.

Donde resulta muy interesante discutir el problema del desorden sería en $d = 3$ con campo magnético aleatorio. Según el criterio de Imry y Ma [19] la fase nemática debería desaparecer y podría ser sustituida por un orden del tipo QLRO[20, 21].

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo cuenta con el apoyo del programa PCP Venezolano-Francés titulado “Fluidos Petroleros”.

-
- [1] N. D. Mermin, H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **22** (1966) 1133.
 - [2] V. L. Berezinskii, *Sov. Phys. JETP* **32** (1971) 493.
 - [3] J. M. Kosterlitz, D. J. Thouless, *J. Phys. C* **6** (1973) 1181.
 - [4] J. M. Kosterlitz, *J. Phys. C* **7** (1974) 1046.
 - [5] A. M. Polyakov, *Phys. Lett. B* **59** (1975) 79.
 - [6] U. Wolff, *Nucl. Phys. B* **334** (1990) 581.
 - [7] H. Kawamura, M. Kikuchi, *Phys. Rev. B* **47** (1993) 1134.
 - [8] M. Wintel, H. U. Everts, W. Apel, *Phys. Rev. B* **52** (1995) 13480.
 - [9] H. Kunz y G. Zumbach, *Phys. Rev. B* **46** (1992) 662; *Phys. Lett. B* **257** (1991) 299.
 - [10] P. A. Lebowitz, G. Lasher, *Phys. Rev. A* **6** (1973) 426.
 - [11] A. I. Fariñas-Sánchez, R. Paredes V. y B. Berche, *Phys. Lett. A* **308** (2003) 461.
 - [12] J. L. Cardy, *Nucl. Phys. B* **240** [FS12] (1984) 514.
 - [13] B. Berche, A. I. Fariñas-Sánchez y R. Paredes V., *Europhys. Lett.* **60** (2002) 539.
 - [14] B. Berche, *J. Phys. A* **36** (2003) 585.
 - [15] U. Wolff, *Phys. Rev. Lett.* **62** (1989) 361.
 - [16] R. Paredes V., A. I. Fariñas-Sánchez y B. Berche, *no publicado*.
 - [17] B. Berche, A. I. Fariñas-Sánchez, Y. Holovatch y R. Paredes V., *Eur. Phys. J. B* **36** (2003) 61.

- [18] A. B. Harris, *J. Phys. C* **7** (1974) 1671.
- [19] Y. Imry, S. K. Ma, *Phys. Rev. Lett* **35** (1975) 1399.
- [20] J. Chakrabarti, *Phys. Rev. Lett.* **81** (1998) 385.
- [21] D. E. Feldman, *Phys. Rev. Lett.* **84** (2000) 4886.